

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Факультет прикладной математики и информатики

Кафедра математического моделирования и управления

Аннотация к дипломной работе

**«Моделирование формирования дефектов в кремнии
кинетическим методом Монте-Карло»**

Корсак Павел Олегович

Научный руководитель – доцент кафедры ММУ Белько В.И.

2015

Реферат

Дипломная работа, 30с., 10 источников, 15 рисунков, 3 таблицы.

КИНЕТИЧЕСКИЙ МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО, КЛАСТЕРЫ ДЕФЕКТОВ.

Объект исследования – процесс зарождения и роста одиночных и “311-дефектов” в кремнии при различных температурах.

Цель работы – модификация имеющейся реализации алгоритма Монте-Карло, оценка его адекватности путем сравнения с результатами непрерывной модели и анализ динамики процесса.

Метод исследования – проведение вычислительных экспериментов с использованием пакетов программ, построение и анализ графиков.

В данной работе была выполнена модификация алгоритма кинетического метода Монте-Карло и использована для моделирования процесса зарождения и роста “311-дефектов” в кремнии при различных температурах и начальных концентрациях дефектов.

Также была рассмотрена реализация непрерывной модели для описания данного процесса, основанной на численном решении системы уравнений в частных производных.

Сравнение результатов, полученных различными методами и моделями, с экспериментальными данными показало их разумное соответствие. По этим результатам была изучена динамика процесса отжига, а также влияние на нее температуры.

Также в данной работе была реализована упрощенная версия алгоритма Монте-Карло и изучено влияние температуры на эволюцию популяции одиночных и “311-дефектов”.

Abstract

Diploma thesis, 30 p., 10 literary sources, 15 pictures, 3 spreadsheet.

KINETIC MONTE CARLO METHOD, DEFECT CLUSTERS.

The object of study – the process of nucleation and growth of single and "311-defects" in silicon at different temperatures.

Purpose – Modify an existing implementation of Monte Carlo, an assessment of its adequacy by comparing the results of the continuous model and analysis of the dynamics of the process.

Method of research– conducting computational experiments with the use of software packages, the construction and analysis of graphs.

In this work was carried out modification of the algorithm of the kinetic Monte Carlo method and used to simulate the process of nucleation and growth of the "311-defects" in silicon at different temperatures and concentrations of initial defects.

It is also considered the implementation of the continuous model for the description of the process, based on the numerical solution of partial differential equations.

Comparison of the results obtained by different methods and models with experimental data revealed their reasonable satisfaction. According to these results has studied the dynamics of the annealing process, and the influence of temperature on it.

Also in this study it was implemented a simplified version of Monte Carlo and studied the effect of temperature on the evolution of the population of single and "311-defects."